

Метод расчета равновесной формы отрицательного кристалла

Скорынина Алина Александровна
Южный федеральный университет
Гершанов Владимир Юрьевич
alinaskorynina@rambler.ru

Предложен метод расчета равновесной формы отрицательного кристалла, под которым понимается жидкое включение в кристалле, форма и симметрия которого совпадают с симметрией самого кристалла [1].

В основе метода лежит расчет зависимости свободной межфазной энергии отрицательного кристалла от размеров плоских участков (фасет) с меньшей, зависящей от анизотропии, удельной межфазной энергией. Увеличение размеров фасет при постоянном объеме полости приводит к увеличению радиуса сферической части отрицательного кристалла и, следовательно, к увеличению площади межфазной границы и ее свободной энергии. Минимумы полученных зависимостей соответствуют размерам фасет для равновесной формы отрицательного кристалла.

Расчеты проводились с помощью программного пакета Maple. Достижение равновесной формы фиксировалось по достижению минимума энергии, что видно из зависимости межфазной свободной энергии от размера плоского участка (рис.1а).

На рисунке 1а показана зависимость изменения свободной межфазной энергии исходного сферического отрицательного кристалла радиусом 15 мкм от размеров и числа фасет при удельной межфазной энергии плоских граней равной 0.95 от удельной энергии сферической межфазной границы. Энергия системы нормирована на энергию исходной сферической межфазной границы.

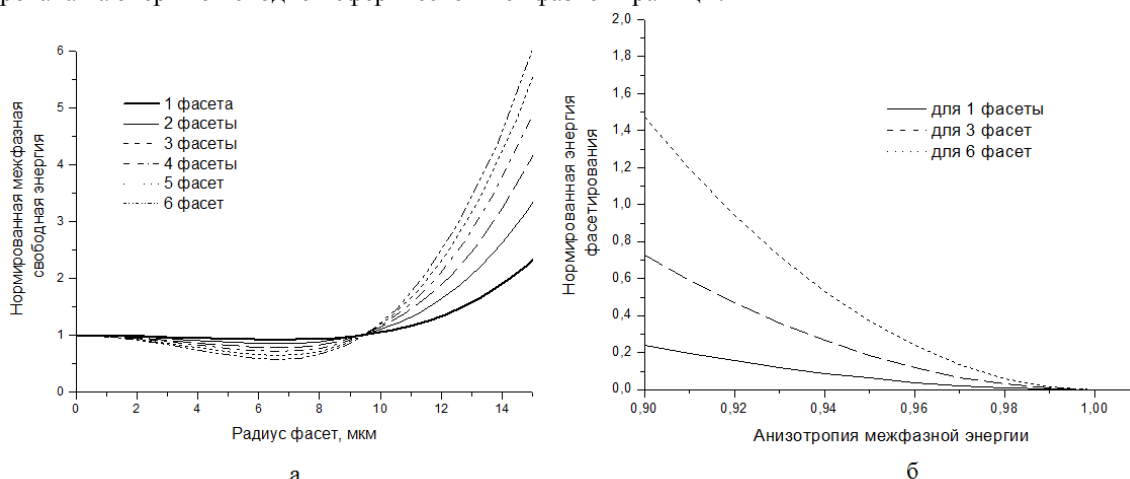


рис.1. (а) Зависимость межфазной свободной энергии от радиуса плоских граней, (б) зависимость энергии фасетирования от анизотропии свободной межфазной энергии

Переход от нефасетированной межфазной границы к равновесной форме отрицательного кристалла происходит за счет массопереноса в системе кристалл – раствор. Движущей силой массопереноса при фасетировании поверхности отрицательного кристалла является разность между свободной межфазной энергией исходной несингулярной поверхности отрицательного кристалла и свободной межфазной энергией поверхности равновесного кристалла, радиус несингулярной части которого будет больше радиуса исходной сферы. Зависимость понижения свободной межфазной энергии отрицательного кристалла при фасетировании в зависимости от степени анизотропии показана на рис 1б в процентных долях от общей свободной энергии для сферической нефасетированной поверхности.

Список публикаций:

[1] Шаскольская М.П. // Кристаллография: Учеб. Пособие для ВУЗов / Издание второе перераб.и дополн. М: Высшая школа. 1984.С. 376